



TITLE:

合金の相分離の時間発展(基研長期
研究計画「非線型・非平衡状態の
統計力学」,研究会報告)

AUTHOR(S):

古川, 浩

CITATION:

古川, 浩. 合金の相分離の時間発展(基研長期研究計画「非線型・非平衡
状態の統計力学」,研究会報告). 物性研究 1978, 29(6): F11-F14

ISSUE DATE:

1978-03-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89502>

RIGHT:

ていることが分る。4種類のクラスターに属している単位胞の総数 N_{OC} について緩和関数を調べてみると、図3のようになる。かなりよく指数関数にのっており、転移点に近づく程傾きが小さくなっている。これより緩和時間を求めると、図4に示すようになる。これは抵抗の測定から実験的に求めた緩和時間の温度依存性と定性的によく一致している。従って、抵抗の時間変化がオーダー又はディスオーダーの部分の大きさに依存し、クラスターの大きさに依存するものではないということを示唆している。

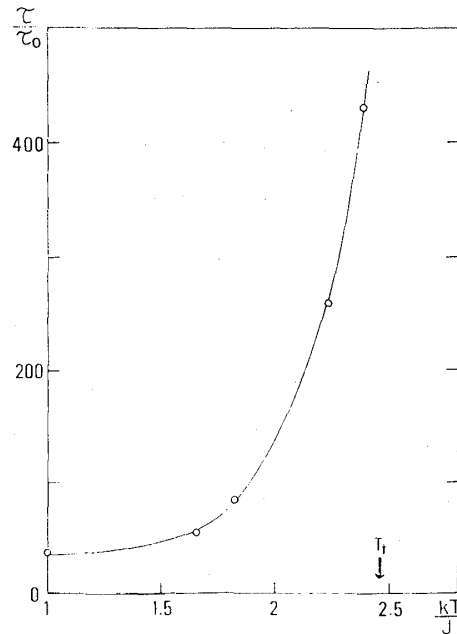


図 4

参 考 文 献

- 1) 西村, 橋本, 竹内, 物理学会第 32 回年会予稿物性 B p10
K. Nishimura, Y. Takeuchi and T. Hashimoto; to be submitted to Solid State Commun.
T. Hashimoto et al.; Phys. Rev. **13** (1976) 1119
- 2) K. Binder Z. Phys: K **267** (1974) 313
- 3) A. Sur et al. Phys. Rev. **15B** (1977) 3014

合金の相分離の時間発展

山口大教育 古 川 浩

急冷された 2 元合金の時間発展を議論する。モデルとして Ginzburg - Landau 型方程式にしたがうものを仮定する。

$$\frac{d}{dt} \eta_{\mathbf{k}} = - k^{\theta} k_B T L \frac{\delta F}{\delta \eta_{\mathbf{k}}^*(t)} + g_{\mathbf{k}}(t), \quad (1)$$

$$\langle g_{\mathbf{k}}(t) g_{\mathbf{k}'}^*(t') \rangle_0 = 2 L k_B T k^\theta \delta(t-t') \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (2)$$

ここで $\langle \rangle_0$ は初期状態での ensemble average. $\langle X(t) \rangle_0$ は時刻 t での平均値を表わす。 $\eta_{\mathbf{k}}(t)$ は局所的な組成 $\eta(\mathbf{r}, t)$ の fourier 成分, L は定数である。講演では $\theta = 2$ の場合について述べたが, これは order parameter η が conserve される場合である。 $\theta = 0$ の場合は η が conserve されない場合である。 F は double peak を持つ coarse-grained 自由エネルギーである。

急冷された後のある時刻 t で体積 R^d 程度の多くのクラスターが出来ているものとする (d : dimensionality)。さらに系が自由エネルギーの局所的な極値にあると仮定する。

$$\frac{\delta F}{\delta \eta_{\mathbf{k}}^*} \doteq 0, \quad \eta_{\mathbf{k}} = 0 \quad \text{for} \quad k < k_C \doteq R^{-1} \quad (3)$$

時刻 t 以後系は (3) で表現される状態を通して相分離するものとする。クラスター内部のゆらぎを無視すれば, 長さのスケールは R のみである。それ故 effective な自由エネルギーは次のように書けるだろう。

$$F = F_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \chi(\mathbf{k}, R)^{-1} |\eta_{\mathbf{k}}|^2 \quad (4)$$

ここで χ は R を不変とした時の定常状態に於ける structure function であり, 次を満足する

$$\chi(\mathbf{k}, R) = \int \chi(r/R) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = R^d \tilde{\chi}(kR) \quad (5)$$

さらに

$$\tilde{\chi}(x) \begin{cases} \gg 1 & \text{for } x < 1 \end{cases} \quad (6-a)$$

$$\ll 1 \quad \text{for } x > 1 \quad (6-b)$$

(6-a) は (3) に対応する。(6-b) は R^d より小さいクラスターが時刻 t 以後には出来ないことをあらわす。(1) 及び (4) より

$$\frac{d}{dt} \eta_{\mathbf{k}}(t) = -L k^\theta k_B T R^{-d} \tilde{\chi}(kR)^{-1} \eta_{\mathbf{k}}(t) + g_{\mathbf{k}}(t) \quad (7)$$

structure function $S(\mathbf{k}, t) = \langle |\eta_{\mathbf{k}}(t)|^2 \rangle_0$ に対して¹⁾

$$\frac{d}{dt}S(\mathbf{k}, t) = -2Lk^\theta k_B T \{ R^{-d} \tilde{\chi}(kR)^{-1} - S(\mathbf{k}, R)^{-1} \} S(\mathbf{k}, t) \quad (8)$$

(8) 式がスケール不変であることから、すなわち (8) の解が

$$S(\mathbf{k}, t) = R^d \tilde{S}(kR) \quad (9)$$

であることから、

$$R \propto t^{a'}, \quad a' = 1/(d+\theta) \quad (10)$$

$\tilde{\chi}(x)^{-1}$ が単調増加関数であると仮定すれば、

i) $S(\mathbf{k}, t)$ は $\theta=0$ のとき $k=0$ に peak をもつ。

ii) $S(\mathbf{k}, t)$ は $\theta=2$ のとき、 $k=k_m \neq 0$ に peak をもつ。

i) の場合 $S(k_{1/2}, t) = \frac{1}{2} S(0, t)$ によって half width を定義する。すると $k_{1/2}, k_m \propto R^{-1} \sim t^{-1/(d+\theta)}$ 、及び peak height R^d 。

これらの結果は計算機実験の結果 ($\theta=0$ 及び 2)^{2,3)} とよく一致している。一方 $\theta=0$ に対する川崎ら⁴⁾の結果は T_c 近傍での Hashimoto ら⁵⁾の実験と consistent である。我々の方法は T_c 近傍に対しては適用出来ない。図は $\tilde{\chi}(x) \propto x^{-4}$ とおいた場合を三次元の spin exchange kinetic Ising model²⁾の計算機実験と $S(\mathbf{k}, t)$ を比較したものである。色々な時刻 (τ) における実験データを (10) をもとにして $\tau=40$ の場合に reduce してある。実線及び 2 点破線は我々の理論、破線はランガーら⁶⁾の理論である。温度は $T=0.59T_c$ 。

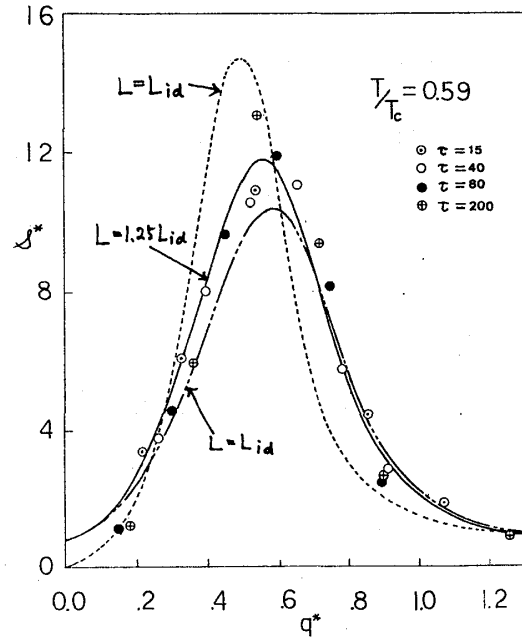


図 1

参 考 文 献

- 1) H. Furukawa, Prog. Theor. Phys. **56** (1976), 464; **58** (1977), 1127.
- 2) J. Marro, A. B. Boltz, M. H. Kalos and J. L. Lebowitz, Phys. Rev. **B13** (1976), 4328.

- 3) C. Kawabata and K. Kawasaki, 研究会講演
- 4) K. Kawasaki, Prog. Theor. Phys. **57** (1977), 410, 及び研究会講演
- 5) T. Hashimoto and K. Nishimura, 研究会講演
- 6) J. S. Langer, M. Bar-on and H. D. Miller, Phys. Rev. **A11** (1975), 1417.

Simple Self-Consistent Methods in the Theory of Spinodal Decomposition and Nucleation

京大教養 富田博之

スピノダル分解で相分離の進展に伴って成長する構造関数の鋭いピークの振舞いは、次のように定性的に理解される。簡単のためイジング・スピン系を想定する。

- (1) 相関々数の sum-rule ;

$$\int d\mathbf{q} S(\mathbf{q}, t) = 1, \quad S(\mathbf{q}, t) = \langle s(\mathbf{q}) s(-\mathbf{q}) \rangle_t$$

- (2) スピン保存則 ; $S(0, t) = \text{const.}$
- (3) 単波長部分は急速に平衡に達し、その部分の面積が長波長域に移動しピークを形成する。
- (4) $t = \infty$ すなわち平衡状態では、LRO の存在により、 $q = 0$ に特異性 $M^2 \delta(q)$ をもち、ピークは $t = \infty$ でこの δ -関数に無限に漸近する。

この観点を生かした近似理論を考える。Langer 達は、TDGL モデルを用いて、局所秩序の発展した段階で、モード結合項を、

$$\langle s(0)^{2n-1} s(\mathbf{r}) \rangle_t \cong \{ \langle s^{2n} \rangle_t / \langle s^2 \rangle_t \} \langle s(0) s(\mathbf{r}) \rangle_t \quad (5)$$

と近似し、構造関数 $S(\mathbf{q}, t)$ に対し発展方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} S(\mathbf{q}, t) = -q^2 (q^2 + A(t)) S(\mathbf{q}, t) + q^2 / K \quad (6)$$